

Introduzione

February 28, 2024

1 METODI DI CALCOLO PER LA CHIMICA

(Mirco Zerbetto, Agostino Migliore)

Osso di Lebombo: considerato il più antico strumento di *calcolo*.

1.1 Calcolo

Il calcolo è la capacità cognitiva che permette di trasformare, su base volontaria, numeri in altri numeri. Alla base del calcolo vi è la capacità di contare. Sebbene questa venga fatta risalire al 35000 a.C., il calcolo inteso come elaborazione dei dati si può ricondurre ai babilonesi del 2000 a.C..

1.2 Il calcolo nella chimica

Sebbene ci si possa interrogare sulla possibilità che una scienza, come la chimica, possa essere sviluppata senza la matematica, è innegabile il ruolo che il calcolo ha avuto, ha, e continuerà ad avere.

Un esempio triviale è il seguente: se io voglio produrre ammoniaca da azoto e idrogeno, dovendo comprare il secondo a quanto devo vendere il prodotto? A parità di tutti gli altri fattori, potrò basare la risposta sulla resa della reazione. Per ottenerla bisogna fare un... calcolo! Anzi, più di uno: trasformare la massa di idrogeno in moli, usare la stechiometria della reazione per ottenere le moli attese di ammoniaca, da queste calcolare la massa e, infine, fare il rapporto tra la massa ottenuta e quella attesa.

L'esempio è forse triviale, ma sicuramente fa capire di come il calcolo può essere utile in chimica. Spingendo verso l'utilizzo più avanzato, il calcolo viene usato in chimica teorica e computazionale, la branca che si occupa di modellizzazione e di simulazione dei fenomeni che coinvolgono la materia, le sue trasformazioni, e la sua interazione con la radiazione elettromagnetica.

L'utilizzo del calcolo nell'indagine chimica è alla base della razionalizzazione delle osservazioni, permettendo di creare relazioni causa-effetto tra i fenomeni.

Saper manipolare i dati è rilevante per un chimico: che relazione esiste tra la resa quantica di uno *switch molecolare* e la temperatura? Che relazione sussiste tra la potenza di un impulso laser e la dispersione delle dimensioni di nanoparticelle d'oro ottenute per ablazione? Come influisce la

viscosità del solvente in un esperimento di diffusione NMR? Si tratta di alcuni esempi in cui il **calcolo** riveste un ruolo importante per imparare a sfruttare i meccanismi della natura una volta che siano stati appresi.

Si aggiunge il fatto che si sta oggi vivendo nell'era dei *big data*, in cui grandi moli di dati devono essere prodotte e analizzate, anche tramite tecniche informatiche avanzate, quali il *machine learning*.

1.3 Scopo del corso

There are many ways to skin a cat(fish)

Lo schema riportato sopra fornisce una semplice catalogazione sui tipi di calcolo, ma tutti condividono i **metodi di calcolo**, forniti dalla matematica. Lo scopo del corso è rappresentato dalla linea viola tratteggiata raffigurata nello schema: fornire la capacità di svolgere calcolo numerico in maniera elettronica.

Il focus sarà dato alla *parte algoritmica* su cui si basa la capacità di risolvere problemi numerici con un calcolatore, ossia sull'apprendimento di come un calcolatore possa essere programmato per svolgere la serie di operazioni per effettuare un calcolo.

Naturalmente, non si può prescindere dalla matematica dei metodi, che dovrà essere affrontata caso per caso in modo da poter comprendere le potenzialità e i limiti dei metodi che verranno studiati.

1.4 Organizzazione del corso

Il corso si divide in una parte dedicata al *coding*, l'abilità di implementare un algoritmo per svolgere un calcolo in modo tale che un computer possa svolgere autonomamente tale calcolo e fornire i risultati in maniera controllata e che, entro una data tolleranza, siano corretti. Si è scelto di utilizzare il linguaggio Python, che si sta largamente diffondendo in ambito scientifico per la semplicità con cui si possono scrivere algoritmi anche complessi. Inoltre, gli strumenti di interpretazione di tale linguaggio sono *open*, per cui con licenze di libera distribuzione. Infine, ci sono molti strumenti, come il Jupyter Lab e Google Colab (che useremo nel corso), che permettono di gestire gli algoritmi in maniera interattiva e intuitiva.

Nella seconda parte del corso si affronteranno i metodi di calcolo catalogati in funzione del problema che intendono affrontare: * integrazione, derivazione e ricerca di minimi * trasformate di Fourier * soluzione di equazioni lineari e non-lineari * soluzione di equazioni differenziali * interpolazione e *modeling* statistico

Lo studio di questi argomenti verrà impostato sempre partendo da un problema tipico della pratica di ricerca in ambito chimico quale obiettivo per stimolare l'apprendimento dei metodi.

1.5 Modalità d'esame

Ad ogni studentessa e studente verrà assegnato un progetto che dovrà svolgere in autonomia, per poi discutere all'esame (che sarà di tipo orale) il modo con cui il problema sia stato affrontato e risolto.